

УДК 532.525.2:537.523.3

© 2007 г. А.Б. ВАТАЖИН, В.Е. КОЗЛОВ, А.М. СТАРИК, Е.К. ХОЛЩЕВНИКОВА

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ АЭРОЗОЛЬНЫХ ЧАСТИЦ В СТРУЯХ РЕАКТИВНЫХ ДВИГАТЕЛЕЙ

Проведено численное моделирование процессов формирования жидких сульфатных аэрозолей в осесимметричной изобарической струе дозвукового самолета. Определены особенности возникновения и эволюции сульфатных аэрозолей, обусловленные двумерными эффектами: неоднородностью параметров в начальном сечении струи (на срезе сопла), смешением горячей двигательной струи с внешним холодным потоком воздуха и турбулентной поперечной диффузией аэрозольных частиц и компонентов газовой смеси. Используются уравнения газовой динамики для турбулентной осесимметричной изобарической струи, уравнения химической кинетики, уравнения для жидких фракций воды и серной кислоты и соотношения для бинарной нуклеации, конденсационного роста и коагуляции аэрозольных частиц. Получены распределения характеристик, определяющих формирование аэрозольной фазы в двигательной струе самолета В-747, и определена топология зоны нуклеации в такой струе.

Ключевые слова: осесимметричная струя, авиационные двигатели, химическая кинетика, бинарная нуклеация, сульфатные аэрозоли.

Аэрозоли, образующиеся в струях реактивных двигателей, существенным образом могут влиять на аэрозольный состав атмосферы, ее радиационный баланс и климат [1–3]. Измерения показали, что основное количество аэрозольных частиц, эмитируемых авиацией в атмосферу (80–90%), составляют жидкие сульфатные аэрозоли, размер которых лежит в диапазоне 1–10 нм [4–8]. В последние годы в результате интенсивных расчетных и экспериментальных исследований был достигнут значительный прогресс в понимании механизмов формирования этих аэрозолей в спутных струях до- и сверхзвуковых самолетов [7–17]. При этом были развиты детальные физико-химические модели образования аэрозольных частиц, позволяющие определять эволюцию функции распределения частиц по размеру и их состав [9–17]. Так, было показано, что значительная концентрация достаточно крупных сульфатных аэрозолей с диаметром $d > 5$ нм в струе ($\sim 10^8$ см⁻³) может быть частично объяснена конверсией диоксида серы SO₂, являющегося основным S-содержащим компонентом продуктов сгорания авиационного керосина, в SO₃ и H₂SO₄ в тракте двигателя и на начальном участке реактивной струи [8, 16, 17], а также влиянию ионов, образующихся в высокотемпературной зоне камеры сгорания, на коагуляцию возникающих в струе в результате нуклеационных и конденсационных процессов мелких аэрозольных частиц с $d = 1–2$ нм [12, 13].

В ряде случаев было получено хорошее соответствие между расчетными и экспериментальными данными. Однако вплоть до настоящего времени некоторые вопросы так и не нашли своего объяснения. Так, например, практически все современные модели предсказывают появление аэрозольных частиц на расстояниях более 40 м от среза сопла двигателя типичного пассажирского дозвукового самолета на крейсерском режиме полета. В то же время экспериментальные исследования показывают, что формирование жидких аэрозолей может происходить значительно раньше – на расстояниях 20–30 м от среза сопла [6]. Не до конца выяснен вопрос о роли ионов и органических соединений, эмитируемых из камеры сгорания, на формирование аэрозольных частиц, а так-

же роль сульфатных аэрозолей в образовании ледовых частиц и видимого следа самолета.

Хотя для объяснения особенностей формирования аэрозолей применялись детальные физико-химические модели, гидродинамические процессы рассматривались в рамках упрощенных нуль-мерных [8–13] или квазиодномерных [14–17] моделей. Были попытки учесть неоднородный характер распределений химического состава смеси и концентрации аэрозолей в турбулентной спутной струе на основе расчета физико-химических процессов вдоль струек тока, расположение которых и изменение вдоль них плотности, температуры и скорости находились из ранее полученного решения гидродинамической задачи. Ясно, что при таком подходе не учитываются эффекты диффузии и их влияние на образование конденсированной фазы. Однако еще в [18] указано на то, что гидродинамические неоднородности могут существенно повлиять на характер распределения аэрозолей в паровоздушных изобарических турбулентных струях. Расчеты [19] показали, что и химические процессы в таких струях в значительной степени определяются поперечными градиентами концентраций реагирующих компонентов.

Цель данной работы – анализ влияния эффектов неоднородности течения в струях реактивных двигателей дозвуковых самолетов на динамику формирования в них сульфатных аэрозолей. Эти эффекты обусловлены неоднородным распределением параметров на срезе сопла реактивного двигателя, смешением истекающего из него газа с холодным атмосферным воздухом и поперечной диффузией компонентов смеси и частиц аэрозоля в струе.

1. Физико-математическая модель. Для расчета динамики формирования сульфатных аэрозолей в выхлопной осесимметричной струе воздушно-реактивного двигателя используется предположение, что химические и конденсационные процессы не влияют на газодинамику течения (распределения скорости, плотности и температуры газа) [20]. Это обусловлено тем, что мольные доли всех компонентов газовой смеси на срезе сопла, за исключением N_2 и O_2 , являются достаточно малыми или очень малыми величинами (мольная доля паров воды, участвующих в образовании аэрозолей, составляет 0.04, а мольная концентрация паров серной кислоты, также участвующих в этом процессе, оказывается еще меньше). Предварительные расчеты процессов в выхлопной струе реактивного двигателя, проведенные с учетом и без учета влияния химических и конденсационных процессов на газодинамические параметры, дали практически одинаковый результат. Это позволяет рассматривать протекание химических превращений и образование конденсированной фазы на фоне независимо рассчитанных распределений газодинамических параметров. Таким образом, общая система уравнений включает в себя газодинамические уравнения, уравнения химической кинетики для компонентов смеси и уравнения для дисперсной фазы с учетом коагуляции частиц.

Газодинамические уравнения. Уравнения сохранения массы, импульса, энергии и уравнение для турбулентной вязкости в случае осесимметричной турбулентной изобарической струи имеют вид (см., например, [21])

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho ru)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho rv)}{\partial r} &= 0, \quad \rho u \frac{\partial u}{\partial x} + \rho v \frac{\partial u}{\partial r} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\rho r \varepsilon \frac{\partial u}{\partial r} \right) \\ \rho u \frac{\partial h_0}{\partial x} + \rho v \frac{\partial h_0}{\partial r} &= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\rho r \varepsilon}{Pr} \frac{\partial h_0}{\partial r} \right) + \left(1 - \frac{1}{Pr} \right) \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[\rho r \varepsilon \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{u^2}{2} \right) \right] \end{aligned} \quad (1.1)$$

$$h_0 = h + \frac{u^2}{2}, \quad h = \frac{k}{k-1} \frac{p}{\rho}$$

$$\rho u \frac{\partial \varepsilon}{\partial x} + \rho v \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(2 \rho r \varepsilon \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} \right) + \alpha^* \rho \varepsilon \left| \frac{du}{dr} \right|, \quad \alpha^* = 0.2 - \frac{5 \varepsilon}{a^2} \left| \frac{\partial u}{\partial r} \right|$$

Здесь x, r – координаты в осесимметричной струе; u, v – соответствующие компоненты скорости; p и ρ – давление и плотность газа, ε – коэффициент турбулентной вязкости, a – скорость звука в газе, h – энтальпия смеси. В общем случае величина h должна включать вклады всех компонентов газовой смеси и конденсированной фазы. Однако в силу малости концентраций аэрозольных частиц в струе ($\sim 10^{10} \text{ см}^{-3}$) по сравнению с концентрацией молекулярных компонентов ($\sim 10^{19} \text{ см}^{-3}$) и малостью массы конденсированной фазы ее вкладом в энтальпию смеси можно пренебречь. Поскольку в струе образуются лишь компоненты, мольная доля которых не превышает 10^{-4} , и тепловыделение, обусловленное протеканием химических реакций, пренебрежимо мало, справедливо приближение совершенного газа. Для смеси продуктов сгорания углеводородных топлив с воздухом (именно такая смесь характерна для выхлопной струи реактивного двигателя) с хорошей точностью можно положить $k = 1.4$.

Турбулентное число Прандтля, P_r , принималось равным 0.7. Последнее уравнение системы (1.1) описывает изменение турбулентной вязкости ε в соответствии с однопараметрической моделью турбулентности [21]. Система уравнений (1.1) интегрируется при задании граничных условий для газодинамических величин и для турбулентной вязкости на срезе сопла реактивного двигателя и в окружающей атмосфере.

Уравнения химической кинетики. Рассмотрим процесс образования сульфатных аэрозолей, которые возникают из газовой фазы вследствие объемной бинарной нуклеации паров H_2O и H_2SO_4 и дальнейшей конденсации этих компонентов газовой смеси на образовавшихся ядрах. Поскольку процессы нуклеации и конденсации приводят к изменению концентрации H_2O и H_2SO_4 в газовой фазе, а следовательно, и к изменению скоростей реакций с участием этих компонентов, то уравнения химической кинетики должны интегрироваться совместно с уравнениями, описывающими образование и эволюцию конденсированной фазы. Формирование сульфатных аэрозолей может влиять и на изменение концентрации других химических компонентов [20].

Система уравнений химической кинетики, описывающая изменение числовой концентрации N_i компонента i смеси вследствие протекания химических реакций и ухода данного компонента в конденсированную фазу, имеет вид

$$\rho u \frac{\partial(N_i/\rho)}{\partial x} + \rho v \frac{\partial(N_i/\rho)}{\partial r} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[\frac{\rho r \varepsilon}{Sc} \frac{\partial(N_i/\rho)}{\partial r} \right] + (G_i - J_{ci})$$

$$G_i = \sum_{q=1}^L S_{iq}, \quad S_{iq} = (\alpha_{iq}^- - \alpha_{iq}^+) (R_q^+ - R_q^-) \quad (1.2)$$

$$R_q^{+(-)} = k_q^{+(-)} \prod_{j=1}^{n_q^{+(-)}} N_j^{\alpha_{jq}^{+(-)}}$$

Здесь L – число химических реакций, приводящих к образованию (разрушению) i -го компонента; $\alpha_{iq}^{+(-)}$ – стехиометрические коэффициенты прямой (+) и обратной (–) q -й химической реакции; $n_q^{+(-)}$ – число компонентов, участвующих в прямой и обратной реакции; J_{ci} характеризует совокупную скорость ухода i -го компонента в конденсированную фазу в результате спонтанной (гомогенной) нуклеации и гетерогенной конденсации ($i = 1$ и 2 для H_2O и H_2SO_4 , $J_{ci} = 0$ для $i > 2$); Sc – турбулентное число Шмидта, которое для дозвуковых изобарических струй полагается равным 0.7.

Кинетическая модель неравновесных химических процессов в струе двигателя включала 59 реакций с участием 20 ($1 \leq i \leq 20$) компонентов: O , O_2 , O_3 , H , H_2 , OH , HO_2 , H_2O , N_2 , NO , NO_2 , NO_3 , N_2O_5 , HNO , HNO_2 , HNO_3 , SO_2 , SO_3 , HSO_3 , H_2SO_4 . Эта модель была по-

лучена на основе редукции более полной схемы, разработанной в [22] для анализа фотохимических процессов в спутных струях реактивных двигателей и позволяющей рассматривать химические превращения в струе, обусловленные не только охлаждением продуктов сгорания, эмитируемых из сопла двигателя, но и смешением этих компонентов с воздухом, содержащим малые атмосферные компоненты, в том числе и те, которые влияют на формирование H_2SO_4 в струе.

Уравнения для дисперсной фазы. Помимо нуклеации и конденсационного роста капель на формирование последних в струе реактивного двигателя сильное влияние оказывает коагуляция образовавшихся частиц [10–17]. Она изменяет спектральный состав (размеры) и концентрацию капель и косвенно, через изменение размера жидких частиц, может повлиять на конденсационные потоки молекул H_2O и H_2SO_4 и, как следствие, даже на массу жидкой фазы. Отметим, что в более ранних работах, посвященных анализу протекания конденсационных процессов в осесимметричных изобарических паровоздушных струях [18, 23], коагуляция не учитывалась.

В данной работе для учета коагуляционного роста аэрозольных частиц используется упрощенный подход, развитый в [24], который позволяет разделить уравнения для массовых долей H_2O и H_2SO_4 в жидкой фазе и для концентрации жидких частиц. При этом предполагается, что в каждой точке пространства могут находиться частицы только одного размера (монодисперсная группа). Такое приближение позволяет получить информацию о некотором среднем размере частиц, который меняется в зависимости от параметров газа и концентраций H_2O и H_2SO_4 в смеси. Уравнения для изменения массовых концентраций α_{1L} и α_{2L} жидких фаз H_2O и H_2SO_4 в этом случае можно представить в виде

$$\begin{aligned} \rho u \frac{\partial \alpha_{1L}}{\partial x} + \rho v \frac{\partial \alpha_{1L}}{\partial r} &= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\rho r \epsilon}{Sc} \frac{\partial \alpha_{1L}}{\partial r} \right) + m_* I_n (1 - z_*) + \rho \Omega J_1 \\ \rho u \frac{\partial \alpha_{2L}}{\partial x} + \rho v \frac{\partial \alpha_{2L}}{\partial r} &= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\rho r \epsilon}{Sc} \frac{\partial \alpha_{2L}}{\partial r} \right) + m_* I_n z_* + \rho \Omega J_2 \end{aligned} \quad (1.3)$$

Здесь m_* – масса критического зародыша, I_n – скорость нуклеации, z_* – массовая доля серной кислоты в критическом зародыше, J_1 и J_2 – скорости конденсации паров H_2O и H_2SO_4 соответственно, $\Omega = N_d/\rho$, где N_d – числовая концентрация капель в единице объема. Изменение величины Ω описывается при помощи следующего уравнения:

$$\rho u \frac{\partial \Omega}{\partial x} + \rho v \frac{\partial \Omega}{\partial r} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\rho r \epsilon}{Sc} \frac{\partial \Omega}{\partial r} \right) + I_n - K_C \rho^2 \Omega^2 \quad (1.4)$$

Константа коагуляции K_C рассчитывалась по формуле [15]

$$K_C = 4\pi(r_{d1} + r_{d2})(D_1 + D_2)f(\text{Kn})$$

$$f(\text{Kn}) = \frac{1 + \text{Kn}}{[\gamma + 2\text{Kn}(1 + \text{Kn})]}, \quad \text{Kn} = 2 \sqrt{\frac{\pi \mu}{8RT}} \frac{D_1 + D_2}{r_{d1} + r_{d2}}$$

Здесь r_{d1} и r_{d2} – радиусы сталкивающихся аэрозольных частиц, D_1 и D_2 – их коэффициенты диффузии, $f(\text{Kn})$ – кнудсеновский корректирующий фактор, учитывающий влияние разреженности среды по мере уменьшения размера капли, μ – молекулярная масса смеси, R – универсальная газовая постоянная, γ – коэффициент прилипания частиц при столкновении (как и в [15], полагалось $\gamma = 1$).

Параметры зародыша m_* и z_* и скорость бинарной $\text{H}_2\text{O}/\text{H}_2\text{SO}_4$ нуклеации I_n рассчитывались с учетом образования гидратов на основе классической теории нуклеации по

формулам, приведенным в [20]. Скорости конденсации J_1 и J_2 паров H_2O и H_2SO_4 определялись по формуле Герца – Кнудсена

$$J_i = \frac{\alpha_{vi} 4\pi r_d^2 [p_i - p_{is}(T, z, r_d)]}{\sqrt{2\pi RT/\mu_i}} \quad (i = 1, 2) \quad (1.5)$$

$$p_{is}(T, z, r_d) = p_{is}^\infty(T, z) \exp\left(\frac{2\sigma(z)\mu_i}{r_d(z)\rho_i RT}\right) \quad (1.6)$$

Здесь r_d – радиус капли (его величина определяется через массу капли и плотность раствора H_2O/H_2SO_4 в капле); z – массовая доля H_2SO_4 в капле; p_i – парциальное давление i -ого компонента; p_{is}^∞ – парциальное давление i -ого компонента над плоской поверхностью раствора с массовой долей H_2SO_4 , равной z , при температуре T ; ρ_i и μ_i – плотность и молекулярная масса i -ого компонента; α_{vi} – коэффициент конденсации паров i -ого компонента на поверхность сульфатной частицы. В соответствии с рекомендациями [14] полагалось $\alpha_{v1} = 1$ и $\alpha_{v2} = 0.09$. Все необходимые для расчета молекулярные постоянные и коэффициенты, а также зависимости p_{is}^∞ и $\sigma(z)$ были взяты такими же, как и в [20].

Решение системы уравнений (1.1)–(1.6) находилось численно с помощью монотонной явно-неявной конечно-разностной схемы первого порядка точности по продольной координате и второго порядка точности по поперечной координате. Метод решения таких уравнений описан в [25].

Основная особенность рассматриваемой здесь модели – учет влияния турбулентной диффузии химических компонентов и капель в поперечном направлении на динамику образования конденсированной фазы. Однако рассматриваемая в работе модель конденсационных процессов не позволяет определить спектральный состав аэрозольных частиц в отличие от предложенных ранее квазиодномерных моделей [14–17].

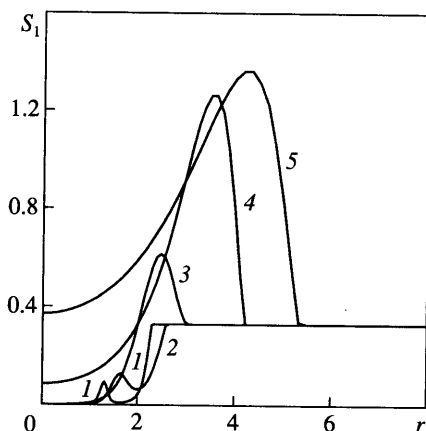
2. Результаты численного моделирования. Конкретный анализ динамики образования сульфатных аэрозолей проводился для струи двигателя самолета В-747 на крейсерском режиме полета (высота $H = 10.7$ км и число Маха $M_0 = 0.8$). Граничные условия для расчета – это параметры газа на срезе сопла и в окружающем пространстве (температура, давление, скорость и состав газа). На самолете В-747 применяются турбореактивные двухконтурные двигатели, например CF6-80, для которого диаметр основного (первого) контура $d_1 = 87.6$ см, а внешнего (второго) контура $d_{II} = 175.1$ см. Газодинамические параметры на срезе сопла для первого и второго контуров соответственно равны: $T_I = 598$ К, $u_I = 475.7$ м/с и $T_{II} = 253.4$ К, $u_{II} = 316.3$ м/с. Давление на срезе сопла равно атмосферному: $p_I = p_{II} = p_0 = 23930$ Па. Температура и скорость в спутном потоке составляют $T_0 = 219.2$ К, $u_0 = 237$ м/с. Состав смеси на срезе сопла основного контура был взят из [17]. Заметим, что этот состав рассчитывался путем интегрирования одномерных газодинамических уравнений в тракте двигателя с учетом протекания неравновесных химических процессов в камере сгорания, турбине и сопле. Для второго контура состав воздуха соответствует атмосферным условиям на высоте $H = 10.7$ км и также взят из [17]. Значения параметров потока и концентраций различных компонентов в мольных долях на срезе сопла основного контура для двух рассматриваемых значений массового содержания серы в топливе $[S]_f = 0$ и 0.04% и в атмосфере приведены в таблице. Полагалось, что концентрация сульфатных аэрозолей в атмосфере на данной высоте пренебрежимо мала: $N_{a\infty} = 0$. Турбулентная вязкость принималась равной $2.5 \cdot 10^{-4} u_1 d_1$ на срезе сопла и $2.5 \cdot 10^{-10} u_1 d_1$ во внешнем потоке. (Величина ϵ выбиралась из следующих соображений. Известно, что $\epsilon \sim 0.1Lu'$, где L – масштаб турбулентности, u' – интен-

| Параметр/Компонент | I контур | | II контур/Атмосфера |
|--------------------------------|---------------|------------------|---------------------|
| | $[S]_f = 0\%$ | $[S]_f = 0.04\%$ | |
| T, K | 598 | | 253.4/219.2 |
| $p, Па$ | 23930 | | 23930 |
| $r, м$ | 0.438 | | 0.875 |
| $u, м/с$ | 475.7 | | 316.3/237 |
| Состав | $[S]_f = 0\%$ | $[S]_f = 0.04\%$ | |
| O | 2.85(-8) | 6.58(-8) | 1.664(-15) |
| O ₂ | 1.54(-1) | 1.54(-1) | 2.002(-1) |
| O ₃ | 2.30(-8) | 5.65(-8) | 7.275(-8) |
| H | 1.23(-14) | 4.63(-14) | 2.35(-20) |
| H ₂ | 3.09(-8) | 2.15(-8) | 9.378(-7) |
| OH | 2.01(-6) | 2.22(-6) | 1.071(-13) |
| HO ₂ | 5.71(-10) | 5.66(-9) | 1.406(-11) |
| H ₂ O | 4.00(-2) | 3.99(-2) | 5.768(-5) |
| N ₂ | 7.74(-1) | 7.74(-1) | 7.995(-1) |
| NO | 1.05(-4) | 1.24(-4) | 1.003(-11) |
| NO ₂ | 6.77(-5) | 4.18(-5) | 6.027(-12) |
| NO ₃ | 4.52(-8) | 2.61(-8) | 3.598(-15) |
| N ₂ O ₅ | 0 | 0 | 1.65(-13) |
| HNO | 6.07(-15) | 7.09(-14) | 0 |
| HNO ₂ | 1.07(-6) | 1.66(-6) | 3.879(-14) |
| HNO ₃ | 6.26(-10) | 3.73(-10) | 2.271(-10) |
| SO ₂ | 4.76(-9) | 5.21(-6) | 3.793(-9) |
| SO ₃ | 3.78(-10) | 4.47(-7) | 0 |
| HSO ₃ | 1.25(-13) | 1.51(-10) | 0 |
| H ₂ SO ₄ | 5.54(-11) | 6.51(-8) | 5.06(-13) |

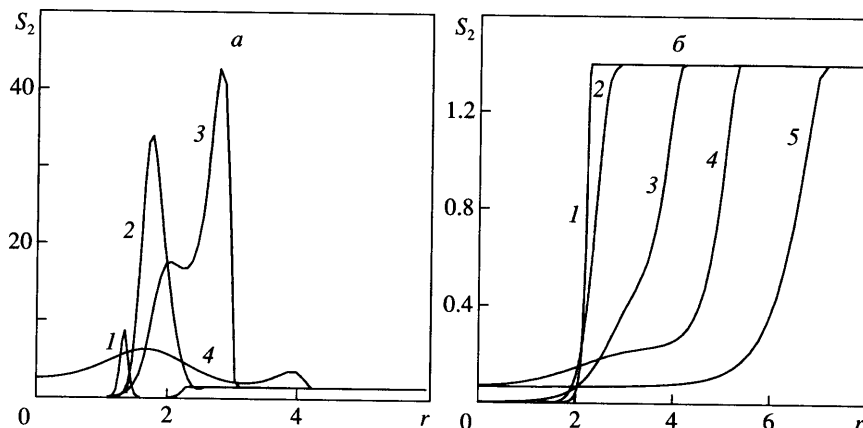
$A(n)$ соответствует $A \cdot 10^n$.

сивность пульсаций скорости. Принято считать, что на срезе сопла авиационного двигателя $L/d_1 \sim 0.1$, $u'/u_1 \sim 0.025$, поэтому на срезе сопла получаем первое приведенное выше значение для ϵ . Во внешнем потоке турбулентная вязкость должна быть меньше молекулярной вязкости. Этому условию удовлетворяет второе приведенное значение ϵ .) Из таблицы видно, что основным S-содержащим компонентом на срезе сопла основного контура двигателя как для $[S]_f = 0\%$, так и для $[S]_f = 0.04\%$, является SO₂. В выходном сечении сопла заметная концентрация достигается и для паров серной кислоты. Важно отметить, что даже при отсутствии серы в топливе концентрация этих компонентов в выхлопе двигателя заметно превышает их концентрацию в атмосфере. Обусловлено это окислением CS₂, COS, H₂S и SO₂ в камере сгорания двигателя, куда эти компоненты поступают вместе с атмосферным воздухом [17].

Присутствие H₂SO₄ в выходном сечении сопла и при $[S]_f = 0\%$ говорит о том, что даже для топлив, не содержащих серу или ее соединения, например для водорода или метана, в выхлопной струе возможно формирование сульфатных аэрозолей. Необходимое условие для образования таких частиц (на первом этапе это зародыши или ядра нуклеации) – наличие областей, где достигаются коэффициенты насыщения, большие единицы. При бинарной нуклеации вводятся два коэффициента насыщения: S_1 и S_2 , которые



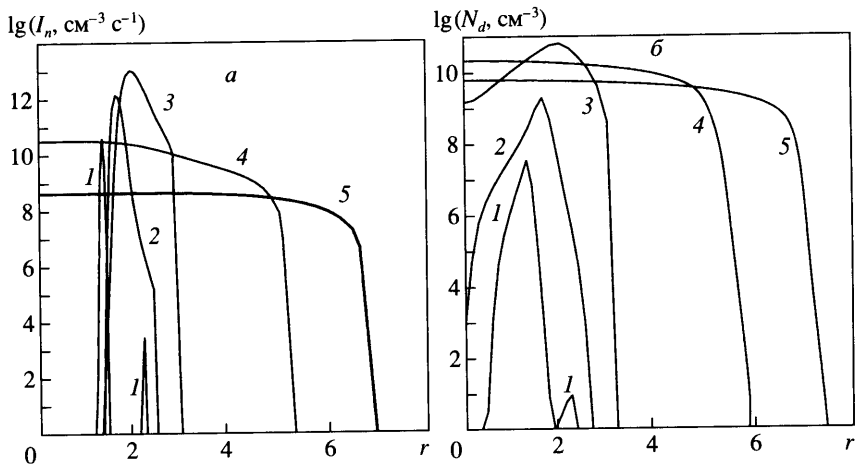
Фиг. 1. Изменение величины пересыщения по парам воды, S_1 , по радиусу в сечениях струи: $x = 4; 10; 20; 40; 60$ м (1–5)



Фиг. 2. Изменение величины пересыщения по парам H_2SO_4 , S_2 , по радиусу в сечениях струи: $x = 4; 10; 20; 40$ м (1–4) для $[S]_f = 0.04\%$ (а) и $x = 4; 20; 40; 60; 100$ м (1–5) для $[S]_f = 0\%$ (б)

определяются как отношения парциальных давлений паров воды и серной кислоты к их равновесным значениям над плоской поверхностью раствора H_2O/H_2SO_4 . На фиг. 1 показано изменение S_1 (пересыщение по H_2O) по радиусу в различных сечениях струи. Видно, что по парам H_2O пересыщение ($S_1 > 1$) достигается только на периферии струи в достаточно узком слое $3 < r < 5$ (здесь и далее даны безразмерные значения радиуса $r' = 2r/d_1$, а штрих, где возможно, опускается) и на достаточно больших расстояниях от среза сопла ($x = 40–60$ м). Максимальное значение S_1 не превышает 1.37. Это означает, что если бы в продуктах сгорания не содержались H_2SO_4 или SO_2 , который в струе может конвертироваться в H_2SO_4 , конденсация паров H_2O не происходила бы. На это уже указано ранее в [14], где расчет конденсационных процессов в струе самолета В-707 проводился по струйкам тока.

Напротив, пересыщение по парам H_2SO_4 ($S_2 > 1$) реализуется в большей части струи для $[S]_f = 0.04\%$, а при отсутствии серы в топливе ($[S]_f = 0\%$) – вблизи границы струи, и его максимальное значение равно 1.4 (фиг. 2). Для $[S]_f = 0.04\%$ максимальное значение



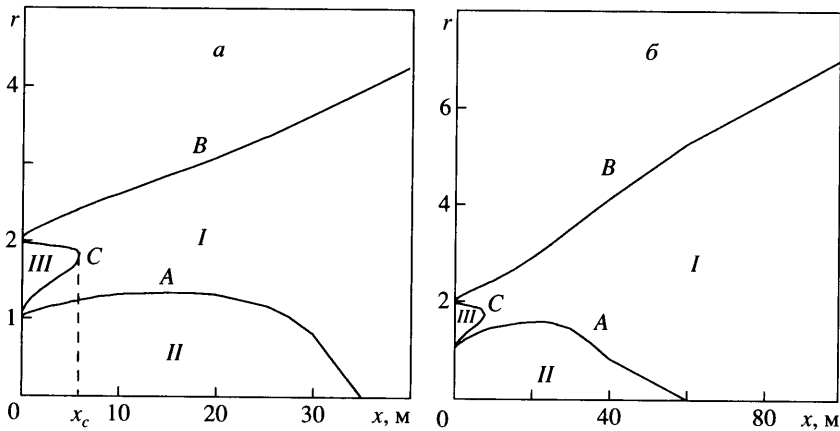
Фиг. 3. Изменение скорости нуклеации (а) и концентрации аэрозолей (б) по радиусу в сечениях струи: $x = 4; 10; 20; 60; 100$ м (1–5) при $[S]_f = 0.04\%$

S_2 достигается при $x = 20$ м и составляет 42. Следует отметить, что на струйке тока, соответствующей границе первого и второго контуров двигателя, уже на расстоянии 4 м от среза сопла достигаются при $[S]_f = 0.04\%$ большие значения S_2 ($S_2 = 8$). На оси струи значения $S_2 > 1$ реализуются на значительно больших расстояниях от среза сопла ($x \geq 35$ м).

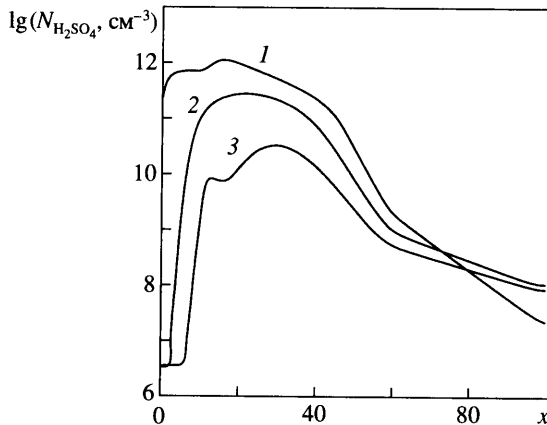
Наличие таких значительных пересыщений по парам H_2SO_4 приводит к бинарной ($\text{H}_2\text{O}/\text{H}_2\text{SO}_4$) нуклеации и возникновению зародышей (их радиус зависит от величины S_2 и составляет 0.4–0.5 нм). Нуклеация начинается на струйке тока, соответствующей границе первого и второго контуров двигателя, и в области внешней тепловой границы струи очень близко от среза сопла ($x = 4$ м) (фиг. 3). Тепловая граница струи определяется по ближайшей к оси точке, в которой выполняется условие $|(T - T_\infty)/(T_0 - T_\infty)| \leq 0.01$, где T_0 и T_∞ – температура на оси струи и в окружающей атмосфере. При этом концентрация сульфатных аэрозолей N_d в сечении $x = 4$ м при $r = 1$ составляет $3.6 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-3}$.

С увеличением расстояния от среза сопла происходит охлаждение газа, расширение области, в которой происходит нуклеация, и увеличение концентрации сульфатных частиц. Так, например, при $x = 10$ м максимальное значение $N_d = 2 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-3}$ достигается при $r = 1.6$. В то же время при $x = 20$ м максимальное значение N_d достигается уже при $r = 2$ и составляет $\sim 7 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$. Интересно отметить, что на оси струи ($r = 0$) нуклеация начинается только при $x \geq 35$ м, но тем не менее аэрозольные частицы на оси появляются в заметном количестве: $N_d = 2 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-3}$ уже при $x = 15$ м, а на расстоянии 20 м от среза сопла их концентрация достигает $1.6 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-3}$. Этот эффект обусловлен диффузией частиц из области, лежащей на границе струй, истекающих из первого и второго контуров двигателя. Именно он объясняет, почему в полетных экспериментах мелкие частицы с диаметром $d \leq 2$ нм регистрируются на расстояниях 20–25 м от среза сопла, хотя квазиодномерные модели предсказывают образование аэрозолей только при $x > 35$ –40 м.

Наиболее наглядно эффект двумерного характера образования аэрозольных частиц в струе демонстрируется на фиг. 4, где для $[S]_f = 0.04\%$ (а) и 0% (б) представлены границы области нуклеации I (линии А, В и С) и зоны II и III, где нуклеация отсутствует. При любом значении $x = \text{const}$ в области $x < x_c$ кривые $N_d(r)$ имеют два максимума, соответствующие двум участкам зоны нуклеации, разделенным кривой С. Линия В представляет собой тепловую границу струи (поскольку полагается, что турбулентные числа Прандтля и Шмидта одинаковы, вне струи H_2SO_4 и другие компоненты не образуются). При отсутствии серы в топливе границы области нуклеации сдвигаются вниз по потоку.



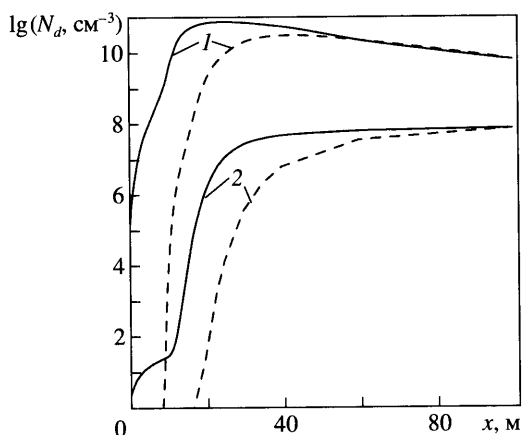
Фиг. 4. Границы зоны нуклеации в струе при $[S]_f = 0.04\%$ (а) и 0% (б)



Фиг. 5. Изменение концентрации молекул H_2SO_4 в смеси вдоль струек тока, соответствующих $r_0 = 0; 1.5; 2$ (1–3) для $[S]_f = 0.04\%$

Так, если при $[S]_f = 0.04\%$ нуклеация на оси начинается при $x = 35$ м, то при $[S]_f = 0\%$ – только при $x = 60$ м.

Величины пересыщения и скорости нуклеации определяются концентрацией паров серной кислоты в продуктах сгорания. Образование H_2SO_4 связано в основном с конверсией SO_2 в H_2SO_4 в тракте двигателя на участке от камеры сгорания до среза сопла [8, 16]. Степень конверсии существенным образом зависит от параметров газа и времени его пребывания внутри тракта двигателя и может изменяться от 2.5 до 10% [7]. Однако и в выхлопной струе может происходить конверсия SO_2 в H_2SO_4 [9, 14–17]. Это подтвердили и настоящие расчеты. На оси струи на участке от среза сопла до $x = 15$ м происходит увеличение концентрации H_2SO_4 (~в 5 раз) за счет конверсии $SO_2 \Rightarrow SO_3 \Rightarrow H_2SO_4$ (в основном это начальный участок струи, его длина ~12.4 м) (фиг. 5). Дальнейшее падение концентрации на длине от 15 до 40 м обусловлено расширением струи. При $x \geq 40$ м начинаются интенсивная нуклеация и рост капель в результате гетерогенной конденсации и уже к $x = 80$ м концентрация H_2SO_4 уменьшается в 10^3 раз. На периферию струи серная кислота поступает за счет диффузии от границ первого и второго контуров дви-

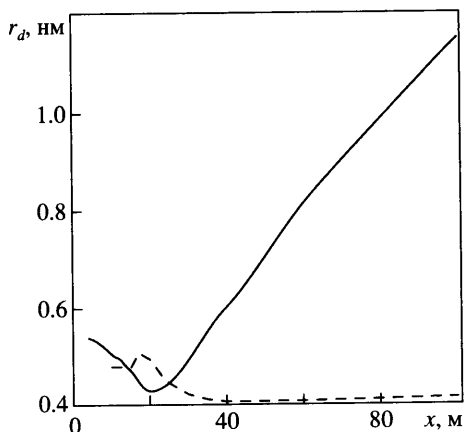


Фиг. 6. Изменение максимальной и осевой концентрации аэрозолей, N_d , вдоль оси струи (сплошные и штриховые линии) для $[S]_f = 0.04$ и 0% (кривые 1 и 2)

гателя, здесь ее концентрация меньше, чем на оси струи. Тем не менее из-за того, что температура в периферийной части струи уменьшается вследствие смешения с атмосферным воздухом значительно быстрее, чем на оси, нуклеация начинается именно в периферийной части.

Поскольку наибольшая скорость нуклеации реализуется в слое смешения струй, истекающих из первого и второго контуров сопла, концентрация аэрозольных частиц в этой области на небольших расстояниях от среза сопла (до $x = 40$ м) максимальна. Это иллюстрирует фиг. 6. При $x > 60$ м концентрация аэрозольных частиц становится практически одинаковой во всей области выхлопной струи, т.е. двумерность течения проявляется только на небольших расстояниях от среза сопла. Отметим также, что концентрация сульфатных аэрозолей в струе при отсутствии серы в топливе достаточно велика. При $[S]_f = 0\%$ наибольшее значение N_d составляет $7.6 \cdot 10^7 \text{ см}^{-3}$ (оно реализуется при $x = 100$ м), что в $\sim 10^3$ раз меньше, чем при $[S]_f = 0.04\%$ (при $[S]_f = 0.04\%$ величина $(N_d)_{\text{max}} \approx 7.9 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$ достигается при $x = 25$ м). Значительно отличается и размер аэрозольных частиц для случаев $[S]_f = 0\%$ и $[S]_f = 0.04\%$, который определяется в основном коагуляцией образовавшихся зародышей и их конденсационным ростом. Средний диаметр аэрозолей при содержании серы в топливе $[S]_f = 0.04\%$ при $x > 20$ м увеличивается с ростом расстояния от среза сопла и при $x = 90$ м составляет ~ 2 нм (фиг. 7). Отметим, что измерения показали присутствие в струе при среднем уровне содержания серы $[S]_f = 0.027\%$ и более крупных частиц с $d = 5$ нм и даже 9 нм, однако их концентрации существенно меньше, чем частиц с $d = 2$ нм [6]. Для топлива, не содержащего серу, диаметр частиц значительно меньше и составляет при $x = 90$ м 0.82 нм. В зоне, примыкающей к срезу сопла ($x < 25$ м), в приосевой области находятся одни лишь зародыши (конденсация паров H_2O и H_2SO_4 и коагуляция в этой области практически не происходят), поэтому их размер определяется в основном концентрацией H_2SO_4 в газовой фазе.

Проведенный анализ указывает на образование мельчайших сульфатных частиц ($d \approx 1$ нм) даже при использовании топлив, не содержащих серу. Это говорит о том, что тезис об экологической безопасности использования водорода в качестве топлива требует более тщательной проверки. Горение водорода сопровождается значительной эмиссией оксидов азота. Выше, чем при горении авиационного керосина, оказывается и содержание в выхлопе паров H_2O и HNO_3 , что может привести к образованию в струе аэрозольных частиц, состоящих из раствора $\text{H}_2\text{O}/\text{H}_2\text{SO}_4/\text{HNO}_3$.



Фиг. 7. Изменение радиуса частиц вдоль оси струи при $[S]_p = 0$ и 0.04% (штриховые и сплошные линии)

Заключение. Представлена физико-математическая модель образования жидких сульфатных аэрозолей в турбулентной струе, истекающей из сопла двухконтурного двигателя современного широкофюзеляжного самолета. Модель включает газодинамические уравнения турбулентной струи, уравнения химической кинетики, а также уравнения для массовых концентраций H_2O и H_2SO_4 в жидкой фазе и уравнение для концентрации аэрозольных частиц и учитывает процессы объемной нуклеации, конденсационного роста и коагуляции образовавшихся частиц. В модели учтены особенности рассматриваемого течения: неоднородность распределения газодинамических параметров и концентраций компонентов в начальном сечении струи, приводящая к развитию внутри нее слоя смешения (начиная от границы контуров), поперечная диффузия компонентов смеси и аэрозольных частиц.

Впервые для выхлопной струи реактивного двигателя широкофюзеляжного самолета определена топология зон бинарной нуклеации паров воды и серной кислоты. Нуклеация начинается на очень коротких расстояниях от среза сопла ($x \approx 4$ м) в слое смешения струй из первого и второго контуров двигателя. На оси сопла нуклеация начинается на значительно больших расстояниях от среза сопла ($x \geq 35$ м), тем не менее из-за диффузии мелких ($d \approx 1$ нм) аэрозольных частиц из этого слоя частицы появляются в значительном количестве ($N_d \sim 10^9$ см $^{-3}$) на оси сопла уже на расстоянии 20 м от среза, что хорошо согласуется с экспериментальными данными. Квазиодномерные модели, применявшиеся ранее для анализа процессов формирования сульфатных аэрозолей в струях реактивных двигателей, этого факта объяснить не могут.

Работа проведена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (№ 05-01-00394-а) и Совета при президенте Российской Федерации по поддержке молодых ученых и ведущих научных школ (грант НШ.9320.20068).

Авторы выражают благодарность А.М. Савельеву за помощь в проведении расчетов и полезные консультации.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Bresseur C.P., Cox R.A., Hauglustaine D., Isacsen I., Lelievelt J., Lister D.A. European scientific assessment of the atmospheric effects of aircraft emissions // J. Atmosph. Environ. 1998. V. 32. № 13. P. 2329–2418.
2. Fahey D.W., Schumann U., Ackermann S. et al. // Aviation and the Global Atmosphere. A special report of International Panel on Climate Change / Ed. J.E. Penner et al. N. Y.: Cambridge: Univ. Press, 1999. P. 65–120.

3. Поповичева О.Б., Старик А.М., Фаворский О.Н. Проблемы влияния авиации на газовый и аэрозольный состав атмосферы // Изв. РАН. Физика атмосферы и океана. 2000. Т. 36. № 2. С. 163–176.
4. Schumann U., Ström J., Busen R. et al. In situ observations of particles in jet aircraft exhausts and contrails for different sulfur-containing fuels // J. Geophys. Res. 1996. V. 101. № D3. P.6853–6869.
5. Schröder F.P., Kärcher B., Petzold R. et al. Ultrafine aerosol particles in aircraft plumes: In situ observations // Geophys. Res. Lett. 1998. V. 25. № 15. P. 2789–2792.
6. Brock C.A., Schröder F., Kärcher B. et al. Ultrafine particle size distributions measured in aircraft exhaust plumes // J. Geophys. Res. 2000. V. 105. № D21. P. 26.555–26.567.
7. Schumann U., Arnold F., Busen R. et al. Influence of fuel sulfur on the composition of aircraft exhaust plumes. The experiments SULFUR 1–7 // J. Geophys. Res. 2002. V. 107. № D15. P. 10.1029/2001JD000813.
8. Brown R.C., Miake-Lye R.C., Anderson M.R., Kolb C.E. Effect of aircraft exhaust sulfur emissions on near-field plume aerosols // J. Geophys. Res. Lett. 1996. V. 23. № 24. P. 3607–3610.
9. Kärcher B., Fahey D.W. The role of sulfur emission in volatile particle formation in jet aircrafts exhaust plume // Geophys. Res. Lett. 1997. V. 24. № 4. P. 389–392.
10. Kärcher B. Physicochemistry of aircraft-generated liquid aerosols, soot, and ice particles: I Model description // J. Geophys. Res. 1998. V. 103. № D14. P. 17.111–17.128.
11. Kärcher B., Yu F., Schröder F.P., Turco R.P. Ultrafine aerosol particles in aircraft plumes: Analysis of growth mechanisms // Geophys. Res. Lett. 1998. V. 25. № 15. P. 2793–2796.
12. Yu F., Turco R.P. The formation and evolution of aerosols in stratospheric aircraft plumes: Numerical simulations and comparisons with observations // J. Geophys. Res. 1998. V. 103. № D20. P. 25.915–25.934.
13. Yu F., Turco R.P., Kärcher B. The possible role organics in the formation and evolution of ultrafine aircraft particles // J. Geophys. Res. 1999. V. 104. № D4. P. 4079–4087.
14. Brown R.C., Miake-Lye R.C., Anderson M.R., Kolb C.E., Resch T.J. Aerosol dynamics in near-field aircraft plumes // J. Geophys. Res. 1996. V. 101. № D17. P. 22.939–22.953.
15. Gleitsmann G., Zellner R. A modeling study of the formation of cloud condensation nuclei in the jet regime of aircraft plumes // J. Geophys. Res. 1998. V. 103. № D16. P. 19.543–19.556.
16. Савельев А.М., Старик А.М. Динамика образования сульфатных аэрозолей в струях реактивных двигателей // Изв. РАН. МЖГ. 2001. № 1. С. 108–117.
17. Starik A.M., Savel'ev A.M., Titova N.S. et al. Effect of aerosol precursors from gas turbine engines on the volatile sulfate aerosols and ion clusters formation in aircraft plumes // Phys. Chem. Chem. Phys. 2004. V. 6. № 5. P. 3426–3436.
18. Ватажин А.Б., Лебедев А.Б., Мареев В.А. Математическое моделирование различных режимов конденсации в турбулентных изобарических струях // Изв. АН СССР. МЖГ. 1985. № 1. С. 59–67.
19. Wang Z., Chen J.-Y. Modeling of microscale turbulence and chemistry interaction in near-field aircraft plumes. // J. Geophys. Res. 1997. V. 102. № D11. P. 12871–12883.
20. Зайчик Л.И., Лебедев А.Б., Савельев А.М., Старик А.М. Моделирование бинарной конденсации H_2O/H_2SO_4 в струях реактивных двигателей на основе эйлера метода фракций // Теплофизика высоких температур. 2000. Т. 38. № 1. С. 81–90.
21. Козлов В.Е., Секундов А.Н., Смирнова И.П. Модели турбулентности для описания течения в струе сжимаемого газа // Изв. АН СССР. МЖГ. 1986. № 6. С. 38–44.
22. Лебедев А.Б., Старик А.М., Титова Н.С. Численное исследование неравновесных фотохимических процессов в спутной струе дозвукового самолета // Теплофизика высоких температур. 1998. Т. 36. № 1. С. 79–93.
23. Ватажин А.Б., Сафин И.Р., Холщевникова Е.К. Исследование различных режимов конденсации в изобарических турбулентных паровоздушных струях // Изв. РАН. МЖГ. 2002. № 6. С. 35–47.
24. Аветисян А.Р., Алипченков В.М., Зайчик Л.И. Моделирование течения спонтанно конденсирующегося влажного пара в соплах Лаваля // Теплофизика высоких температур. 2002. Т. 40. № 6. С. 938–946.
25. Самарский А.А. Введение в теорию разностных схем. М.: Наука, 1971. 552 с.